

Capítulo 7

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

7.1 – Conclusões

Na primeira parte desta tese, utilizou-se o método de Monte Carlo para simular sistemas tridimensionais compostos por esferocilindros rígidos e sujeitos à ação da gravidade e a vibrações mecânicas. Tais sistemas possuíam sempre paredes planas e rígidas no fundo e no topo. Nas direções laterais, por sua vez, consideravam-se ora paredes cilíndricas rígidas, ora condições de contorno periódicas.

Resultados para sistemas monodispersos mostraram que paredes laterais podem perturbar o processo de compactação das partículas e, assim, impedir que um sistema atinja a sua máxima densidade ou, equivalentemente, sua mínima fração de vazios. Para partículas com volume equivalente ao de uma esfera com diâmetro igual a 1×10^{-3} m, uma redução na amplitude das vibrações de $2,0 \times 10^{-3}$ m para $0,5 \times 10^{-3}$ m promoveu a formação de leitos mais densos, principalmente no caso de partículas pouco alongadas. Em qualquer das condições simuladas, os resultados obtidos sugerem que a fração de vazios de um leito monodisperso de esferocilindros, como uma função da razão de alongamento (φ) de suas partículas constituintes, é inicialmente decrescente, passa por um mínimo em $\varphi \approx 0,5$ e, então, torna a crescer. Portanto, há esferocilindros que produzem leitos monodispersos mais compactos que aqueles constituídos por esferas. Este resultado pode ser usado, por exemplo, para se aumentar a capacidade de adsorção de leitos granulares destinados ao armazenamento de gás natural veicular.

Também se observou, para leitos monodispersos, que a curva que representa o número médio de contatos por partícula em função da razão de alongamento cresce abruptamente entre $\varphi = 0$ e $\varphi \approx 1$, enquanto permanece praticamente constante para valores de φ maiores que 1. Em relação aos perfis radiais de frações de vazios

calculados para leitos cilíndricos, descobriu-se que a típica oscilação amortecida, observada em leitos de esferas, nas proximidades da parede lateral, também ocorre no caso de esferocilindros, mas com uma atenuação cada vez mais proeminente para partículas mais alongadas.

Para misturas binárias, observou-se o fenômeno da segregação induzida por vibrações mecânicas mesclando-se partículas com iguais volume e densidade, mas com diferentes razões de alongamento. Nos casos estudados, as partículas que se concentravam no fundo dos recipientes eram sempre aquelas responsáveis pelos leitos monodispersos mais densos. Portanto, verificou-se que os sistemas evoluíam para estados com o menor nível possível de energia potencial. Quando se submetia a vibrações mecânicas sistemas contendo esferas e esferocilindros com $\varphi = 2,66$, isto é, partículas que supostamente produzem leitos monodispersos com a mesma fração de vazios, observava-se que, independentemente das condições iniciais, eles evoluíam para estados com misturação completa. Deste modo, pôde-se concluir que a forma geométrica das partículas influencia o fenômeno da segregação de misturas binárias por intermédio do seu efeito sobre a compactação de leitos monodispersos.

Por outro lado, quando se simulava a agitação de misturas de partículas simultaneamente diferentes na forma e no volume, o efeito da diferença de tamanho se mostrava muito importante. Em alguns casos, as partículas maiores se concentravam no topo do leito, ou seja, observava-se o efeito castanha-do-pará, mesmo quando tal comportamento impelia o sistema a níveis mais altos de energia potencial. Baseando-se nestes resultados, conclui-se que, em uma mistura binária de partículas submetida a vibrações, concentram-se no fundo do recipiente as partículas que possuem a maior habilidade de preencher lacunas que venham a se formar no interior do leito, o que provém de um efeito combinado de forma e tamanho.

Na segunda parte da tese, desenvolveu-se uma metodologia completa para a simulação dinâmica de sistemas granulares, modelados tridimensionalmente, através do Método de Elementos Distintos (DEM). Para isto, coligiram-se informações dispersas na literatura e desenvolveram-se formulações independentes para certos pormenores,

tais como o cálculo de interações entre partículas e obstáculos. Também se propuseram aprimoramentos, tais como a substituição do usual método explícito de solução das equações do movimento por um método de predição e correção de 4ª ordem e a utilização de uma nova estrutura de dados para manipulação, ao longo das simulações, de informações sobre pares em contato.

Primeiramente, através de simulações executadas para um sistema simples, nas quais se empregaram diversos valores para o passo de integração, e baseando-se em afirmações de outros autores, inferiu-se que o método sugerido nesta tese para a solução das equações, se comparado àqueles usualmente aplicados, é capaz de aumentar expressivamente a eficiência do DEM.

Simulando-se a formação de leitos monodispersos de esferas por deposição, obteve-se uma configuração desordenada cuja compactação era maior que as daquelas produzidas via Método de Monte Carlo. Com uma posterior aplicação de vibrações verticais de alta frequência e baixa amplitude, a densidade do leito aumentou ainda mais, o que condiz resultados experimentais obtidos por outrem. Através dos perfis radiais de frações de vazios calculados para as citadas configurações e de imagens geradas a partir das mesmas, conclui-se que a maior compactação, promovida pelas vibrações, decorre de um expressivo aumento no grau de ordenação das partículas.

Simulações nas quais se impunham vibrações senoidais de diversas amplitudes e frequências a misturas binárias de esferas com diferentes diâmetros foram capazes de reproduzir dinamicamente o efeito castanha-do-pará. Aumentos na amplitude ou na aceleração relativa resultavam em maiores taxas de misturação e de segregação.

Através da simulação do escoamento de partículas em recipientes com paredes laterais cilíndricas, cada um deles com um orifício circular no fundo, pretendeu-se estudar a descarga de equipamentos como silos e tremonhas. Os resultados obtidos mostram que se pode evitar indesejáveis escoamentos afunilados através da adoção de recipientes com fundos cônicos, em lugar de fundos planos. Além disto, observou-se que a vazão de descarga era constante em cada recipiente, e que fundos com maiores

ângulos de inclinação em relação à horizontal resultavam em maiores vazões. Durante a simulação da descarga de um recipiente com fundo plano e orifício com diâmetro quatro vezes maior que o das partículas, observou-se, em determinado instante do processo, uma repentina contenção do escoamento, provocada pela formação de uma estrutura abobadada sobre o orifício. Com isto, confirma-se que o DEM é capaz de simular, de modo espontâneo, tais ações coletivas entre partículas, que são a causa de grande parte das características não usuais atribuídas a sistemas granulares.

No último estudo, buscou-se reproduzir experimentos realizados por Hunt *et al.* (1999) a respeito da influência de vibrações horizontais sobre a descarga de um recipiente plano delgado. Tais autores observaram fluxos afunilados quando mantinham o recipiente imóvel e uma inversão neste padrão quando impunham vibrações com determinada faixa de frequência. Primeiramente, visando-se reduzir o esforço computacional necessário, tentou-se abordar o problema restringindo-se o movimento das esferas a duas dimensões, porém sem êxito na reprodução dos dados. Então, levando-se em conta que leitos bi e tridimensionais possuem padrões distintos de organização, partiu-se para uma modelagem tridimensional, utilizando-se, como artifício, condições de contorno periódicas em uma das direções. Isto levou a resultados muito mais condizentes com os experimentos, o que evidencia a importância da modelagem tridimensional no estudo de certos comportamentos dinâmicos de meios granulares. Conclui-se, portanto, que a adoção de um modelo bidimensional, muito freqüente em estudos com o DEM, precisa ser devidamente deliberada.

De um modo geral, conclui-se que o DEM é um método de aplicação mais natural à simulação dinâmica de sistemas granulares que os métodos contínuos (segundo a classificação proposta no Capítulo 1). Sua principal desvantagem reside no elevado esforço computacional exigido, o que dificulta a sua aplicação a sistemas com grandes quantidades de partículas. Os resultados granjeados neste trabalho reproduzem de modo conveniente aqueles obtidos por outros autores, o que certifica a validade do programa computacional desenvolvido. Além disto, a variedade de sistemas simulados atesta a sua versatilidade e conseqüente utilidade.

7.2 – Sugestões para Trabalhos Futuros

Com algumas modificações no programa desenvolvido para a simulação de Monte Carlo de sistemas com esferocilindros, poder-se-ia acrescentar ao modelo de interação um potencial atrativo do tipo “poço-quadrado” (Cf. Abreu, 2000, p. 38), o que possibilitaria a simulação de sistemas com partículas de dimensões muito reduzidas, tais como colóides, nos quais forças de van der Waals se tornam importantes.

Como se mencionou no Capítulo 5, o DEM foi implementado na forma de um programa serial. No entanto, características como a habilidade de lidar com números variáveis de partículas ao longo de uma simulação permitem que ele seja paralelizado, segundo o esquema de decomposição espacial (Heffelfinger, 2000), sem necessidade de grandes esforços. Para isto, recomenda-se efetuar a paralelização através do paradigma MPI (acrograma de *Message Passing Interface*), que se encontra muito bem descrito por Pacheco (1997). Dispondo-se de equipamento adequado, isto viabilizaria o estudo de sistemas mais complexos que os passíveis de simulação com o programa atual.

Empregando-se a metodologia proposta no Apêndice B para cálculo do fluxo unidimensional de um fluido e das conseqüentes forças de arrasto exercidas por ele sobre as partículas, o DEM se tornaria apto ao estudo do comportamento de alguns tipos de sistema sólido-fluido. Poder-se-ia, por exemplo, investigar a sedimentação transiente de partículas em meio líquido. Um caso interessante para estudo seria a sedimentação de misturas polidispersas, ou seja, compostas por espécies de partículas com tamanhos e/ou densidades diferentes e, conseqüentemente, velocidades terminas de sedimentação distintas. Em uma suspensão diluída, espera-se que os assentamentos das espécies ocorram quase independentemente. Todavia, se a suspensão for concentrada, interações entre partículas poderão provocar arrasto de algumas espécies e refreamento de outras. Certamente, o DEM é um método adequado ao estudo deste tipo de comportamento.